

Учреждение образования
«Гомельский государственный университет
имени Франциска Скорины»

А. Н. ГОДЛЕВСКАЯ, В. Г. ШОЛОХ, А. А. ШАМЫНА

**ФИЗИКА АТОМА И ВВЕДЕНИЕ
В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ:
СОСТОЯНИЯ И СПЕКТРЫ
МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ**

Практическое пособие

для студентов специальностей
6-05-0533-01 «Физика»,
6-05-0533-02 «Прикладная физика»,
6-05-0533-04 «Компьютерная физика»

Гомель
ГГУ им. Ф. Скорины
2025

УДК 539.1(076)
ББК 22.314.4я73
Г592

Рецензенты:

доктор физико-математических наук П. А. Хило,
кандидат физико-математических наук Ю. А. Гришечкин

Рекомендовано к изданию научно-методическим советом
учреждения образования «Гомельский государственный
университет имени Франциска Скорины»

Годлевская, А. Н.

Г592 Физика атома и введение в квантовую механику: состояния
и спектры многоэлектронных атомов / А. Н. Годлевская,
В. Г. Шолох, А. А. Шамына ; Гомельский гос. ун-т им.
Ф. Скорины. – Гомель : ГГУ им. Ф. Скорины, 2025. – 47 с.
ISBN 978-985-32-0149-9

Практическое пособие подготовлено в целях оказания помощи студентам в овладении базовыми знаниями, а также в подготовке к выполнению лабораторных работ по разделам курса «Физика атомов и введение в квантовую механику», связанным с квантово-механическим описанием состояний многоэлектронных атомов, изучением характеристических рентгеновских спектров атомов.

Адресовано студентам специальностей 6-05-0533-01 «Физика»,
6-05-0533-02 «Прикладная физика», 6-05-0533-04 «Компьютерная физика».

УДК 539.1(076)
ББК 22.314.4я73

ISBN 978-985-32-0149-9

© Годлевская А. Н., Шолох В. Г.,
Шамына А. А., 2025
© Учреждение образования
«Гомельский государственный университет
имени Франциска Скорины», 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	4
Тема 1. Электронное строение сложных атомов.....	5
1.1. Уравнение Шрёдингера для многоэлектронного атома и методы его решения.....	5
1.2. Характеристика состояний атома в одноэлектронном приближении. Электронная конфигурация атома....	6
1.3. Векторные модели атома. Спектроскопическое обозначение состояний атомов. Правила Хунда.....	8
1.4. Квантово-механическое описание состояний атомов щелочных металлов и закономерностей в их спектрах.....	10
1.5. Квантово-механическое описание состояний атома гелия.....	15
Лабораторная работа 1. Изучение электронного строения сложного атома на основе векторной модели Рассела – Саундерса.....	22
Лабораторная работа 2. Изучение электронного строения атома натрия.....	25
Лабораторная работа 3. Изучение спектральных закономерностей атома гелия и изоэлектронных ему атомных систем...	30
Тема 2. Рентгеновские спектры атомов.....	33
Лабораторная работа 4. Изучение закономерностей в рентгеновских спектрах на основе компьютерной модели.....	40
Литература.....	47

ВВЕДЕНИЕ

Физический практикум является одной из главных составляющих университетского образования по физике. Выполняя лабораторные задания, студенты осваивают современные методы измерения физических величин, исследуют физические явления, знакомятся с физическими приборами и приобретают навыки экспериментальной работы на натурных установках и в виртуальной лаборатории, получают экспериментальное подтверждение физических закономерностей, применяют на практике теоретические знания, полученные на лекционных и семинарских занятиях.

Для успешного проведения занятий физпрактикума требуется не только хорошее оснащение учебной лаборатории современными приборами и оборудованием, но и соответствующее методическое обеспечение. К сожалению, учебно-методическая литература по экспериментальному изучению основ физики атома в количестве, достаточном для обеспечения учебного процесса, отсутствует. Обновление учебно-методической базы необходимо и в связи с постановкой лабораторных работ, выполнение которых связано с использованием компьютерных моделей физических явлений.

В настоящее практическое пособие включены соответствующие программе курса общей физики лабораторные работы по разделам, связанным с квантово-механическим описанием состояний многоэлектронных атомов и изучением характеристических рентгеновских спектров атомов.

В практическом пособии приведены краткие теоретические сведения, необходимые студентам для самостоятельной подготовки к выполнению лабораторных работ, методические указания относительно порядка их выполнения и вопросы, предназначенные для самоконтроля. Дополнительную информацию, необходимую при оформлении отчёта о лабораторной работе и подготовке к его защите, студенты могут найти в литературе, список которой имеется в практическом пособии.

ТЕМА 1.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ СЛОЖНЫХ АТОМОВ

1.1. Уравнение Шрёдингера для многоэлектронного атома и методы его решения

Многоэлектронными атомами называют атомы с двумя и более электронами. Уравнение Шрёдингера для многоэлектронных атомов и ионов имеет вид

$$\sum_i^N \Delta_i \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \sum_i^N \gamma \frac{Ze^2}{r_i} - U \right] \Psi = 0, \quad (1.1)$$

где Δ_i – оператор Лапласа i -го электрона;

Ψ – функция состояния (волновая функция) электрона;

r_i – расстояние i -го электрона от ядра;

$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1, k \neq i}^N \gamma \frac{e^2}{r_{ik}}$ – потенциальная энергия взаимодействия

между всеми N электронами ионизированного атома;

r_{ik} – расстояние между i -ым и k -ым электронами;

$\gamma \frac{Ze^2}{r_i}$ – потенциальная энергия взаимодействия i -го электрона

с ядром;

E – полная энергия атома;

$$\gamma = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \cdot 10^9 \text{ Ф/м.}$$

Уравнение Шрёдингера для многоэлектронного атома может быть решено только приближенными методами, прежде всего, методами теории возмущений. При этом в основе решения уравнения Шрёдингера лежит представление энергии межэлектронного взаимодействия U как малого возмущения по сравнению с энергией взаимодействия электронов с ядром. В качестве решений, соответствующих *нулевому приближению*, получаемых без учета величины U , получают соответствующие значения энергии E_n и собственные функции Ψ_n :

$$E_n = \sum_{i=1}^N E_{ni}; \quad \Psi_n = \prod_{i=1}^N \Psi_{ni}, \quad (1.2)$$

где $\prod_{i=1}^N$ – обозначение произведения N волновых функций Ψ_{ni} .

Решение уравнения Шрёдингера методами теории возмущений практически возможно только при малых значениях N .

1.2. Характеристика состояний атома в одноэлектронном приближении. Электронная конфигурация атома

В квантовой механике состояние электрона в атоме характеризуется следующими физическими величинами: полной энергией E_n , модулем орбитального момента количества движения $|\vec{l}|$, проекциями орбитального момента l_z и спинового момента s_z на выделенное направление. Собственные значения операторов этих физических величин квантованы и определяются квантовые числа соответственно через главное n , орбитальное l , магнитное m_l , и спиновое магнитное m_s следующим образом:

$$E_n = -\gamma \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (1.3)$$

(в кулоновском приближении);

$$|\vec{l}| = \hbar \sqrt{l(l+1)}; \quad (1.4)$$

$$l_z = \hbar m_l; \quad (1.5)$$

$$s_z = \hbar m_s, \quad (1.6)$$

где m – масса покоя электрона;

Z – зарядовое число ядра атома;

e – модуль заряда электрона;

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ – приведённая постоянная Планка.

Возможные значения квантовых чисел n , l , m_l , m_s таковы:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots, \infty; \\ l &= 0, 1, 2, 3, \dots, (n - 1); \\ m_l &= \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l; \\ m_s &= \pm \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Модуль спинового момента электрона квантован по правилу

$$|\vec{s}| = \hbar \sqrt{s(s+1)},$$

где $s = \frac{1}{2}$ – спиновое квантовое число электрона.

Как следует из выражений (1.3)–(1.6), для характеристики определённого квантового состояния электрона достаточно указать набор из четырех квантовых чисел n , l , m_l , m_s .

В соответствии с *принципом Паули* в каждом квантовом состоянии в атоме может находиться не более одного электрона. При заданном значении l в атоме существует $2(2l + 1)$ состояний с различными значениями квантовых чисел m_l и m_s . Заданному значению главного квантового числа n соответствует $2n^2$ различных состояний, которые характеризуются одинаковой энергией. Такие состояния называют *вырожденными*, а сам факт их существования – явлением вырождения. *Степень вырождения* (*статистический вес* энергетического уровня) – это количество квантовых состояний, соответствующих определённому значению энергии.

В кулоновском приближении энергию атома в стационарном состоянии можно рассчитать по формуле (1.3). При наличии других взаимодействий (например, межэлектронного, спин-орбитального) энергия зависит также от других квантовых чисел (например, от l и m_l) и вырождение по этим квантовым числам снимается, следствием чего является расщепление энергетических уровней и спектральных линий.

Для определения состояния сложного атома в *одноэлектронном приближении* необходимо указать для каждого из электронов наборы четырёх квантовых чисел n , l , m_l , m_s , располагая их в порядке возрастания энергии.

Закономерность распределения электронов по состояниям в электронных оболочках атомов обусловливает периодичность физико-химических свойств атомов, отражённую в периодической системе элементов. Это распределение определяют на основе: 1) принципа Паули; 2) требования минимальности энергии атома.

Как обобщение результатов исследований был сформулирован ряд эмпирических правил, отражающих основные закономерности распределения электронов по состояниям в разных атомах.

В соответствии с правилом Маделунга – Клечковского *наименьшей энергией электрон обладает в состоянии, в котором величина $(n + l)$ минимальна; при равном значении $(n + l)$ для нескольких состояний наименьшая энергия соответствует состоянию, в котором значение n меньше.*

Электронная структура атома может быть компактно представлена в виде символической записи, называемой *электронной конфигурацией*. Записывая электронную конфигурацию, электронные оболочки располагают в порядке возрастания энергии электронов, а число электронов в них указывают в верхнем индексе справа от символа оболочки. Например, электронная конфигурация атома натрия ($Z = 11$) в нормальном состоянии имеет вид $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$.

Для характеристики состояний сложного атома как единой системы, содержащей более одного электрона, необходимо определить значение полного момента количества движения атома \vec{J} , который складывается из орбитальных \vec{l}_i и спиновых \vec{s}_i моментов отдельных электронов.

1.3. Векторные модели атома. Спектроскопическое обозначение состояний атомов. Правила Хунда

В целях систематизации спектров многоэлектронных атомов и изучения тонкой структуры спектров применяют *векторную модель атома*. В этой модели моменту импульса, соответствующему орбитальному движению каждого электрона, сопоставляют вектор \vec{l} , а моменту импульса, соответствующему спину электрона, – вектор \vec{s} .

Проекции векторов \vec{l} и \vec{s} на некоторое физически выделенное направление (например, совпадающее с направлением внешнего магнитного поля) квантованы и принимают значения, кратные \hbar . Эту особенность называют *пространственным квантованием* орбитального и спинового моментов импульса электронов в атоме. Векторы \vec{l} и \vec{s} не могут быть произвольным образом ориентированы в пространстве, а составляют с выделенным направлением углы, определяемые из условий

$$\alpha_i = \arccos \frac{l_{zi}}{|\vec{l}|}, \beta_i = \arccos \frac{s_{zi}}{|\vec{s}|}.$$

Выделяют два предельных *типа связи* электронов в атоме (*векторные модели* атома): нормальную (Рассела – Саундерса, $\vec{L} - \vec{S}$ -связь) и $\vec{j} - \vec{j}$ -связь.

В модели нормальной связи удовлетворительно описываются так называемые лёгкие и средние атомы, в которых влияние спин-орбитального взаимодействия невелико.

В случае нормальной связи полный момент атома \vec{J} вычисляется по следующему алгоритму:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}, \quad (1.7)$$

где

$$\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i \quad (1.8)$$

– суммарный орбитальный момент атома;

$$\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i \quad (1.9)$$

– суммарный спиновый момент атома.

Правила квантования моментов количества движения \vec{L} , \vec{S} , \vec{J} атома как целого содержат соответственно квантовые числа L , S , J и имеют вид, аналогичный выражению (1.2):

$$|\vec{L}| = \hbar \sqrt{L(L+1)}; |\vec{S}| = \hbar \sqrt{S(S+1)}; |\vec{J}| = \hbar \sqrt{J(J+1)}.$$

Возможные значения квантовых чисел L , S , J положительны и определяются в соответствии с соотношениями (1.7)–(1.9) следующим образом:

$$L = l_1 + l_2 + \dots; l_1 + l_2 + \dots - 1; l_1 + l_2 + \dots - 2; \dots; L_{\min};$$

$$S = s_1 + s_2 + \dots; s_1 + s_2 + \dots - 1; s_1 + s_2 + \dots - 2; \dots; S_{\min};$$

$$J = L + S; L + S - 1; L + S - 2; \dots; |L - S|.$$

Для компактного представления информации о состояниях атомов, в которых реализуется нормальная связь, используют *спектроскопические обозначения*. В зависимости от величины орбитального

квантового числа L состояния обозначают прописными буквами латинского алфавита: S ($L = 0$), P ($L = 1$), D ($L = 2$), F ($L = 3$) и т. д. Справа от прописной буквы в виде нижнего индекса указывают значение квантового числа J , а слева от неё в виде верхнего индекса — *мультиплетность* состояния $\kappa = 2S + 1$. Например, запись 3P_0 соответствует состоянию атома, в ко-тором квантовые числа имеют следующие значения: $L = 1$, $S = 1$, $J = 0$.

В соответствии с *правилами Хунда* при заданной электронной конфигурации наименьшей энергией атом обладает в состоянии с наибольшим возможным значением S и с наибольшим значением L , возможным при таком S . При этом квантовое число J равно $|L - S|$, если заполнено менее половины оболочки, и $J = L + S$ в остальных случаях.

Связь $\vec{j} - \vec{j}$ характерна для тяжёлых атомов, в которых спин-орбитальное взаимодействие существенно. В соответствии с этой моделью момент количества движения атома определяют по следующему алгоритму:

$$\vec{J} = \sum_i \vec{j}_i, \quad (1.10)$$

где $\vec{j}_i = \vec{l}_i + \vec{s}_i$ — полный момент i -го электрона.

1.4. Квантово-механическое описание состояний атомов щелочных металлов и закономерностей в их спектрах

Из числа сложных атомов наиболее простое описание реализуется для атомов щелочных металлов, состояния которых полностью определяются состояниями валентного электрона.

При квантово-механическом описании электронных и спектральных свойств атомов щелочных металлов рассматривают движение единственного электрона внешней оболочки атома (валентного электрона) в поле атомного остова, то есть в поле, создаваемом ядром и электронами полностью заполненных внутренних электронных оболочек. Решение уравнения Шрёдингера в таком приближении (в *модели валентного электрона*) для энергии стационарного состояния валентного электрона имеет вид

$$E_{nl} = -\gamma^2 \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2(n+\sigma)^2} = -\gamma^2 \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2 n^{*2}}, \quad (1.11)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ – главное квантовое число;

σ – квантовый дефект;

$n^* = n + \sigma$ – эффективное главное квантовое число.

В отличие от формулы (1.3) для энергии водородоподобного атома в стационарном состоянии в выражении (1.11) содержится поправочный член σ , посредством которого учитывается взаимодействие валентного электрона с другими электронами атома щелочного металла. Квантовый дефект определяется по формуле

$$\sigma = -C_1 \cdot \gamma \frac{me^2}{\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right)}, \quad (1.12)$$

где C_1 – величина, постоянная для атома с заданным Z ;

l – орбитальное квантовое число.

Влияние внутренних электронных оболочек можно учесть также, вводя эффективный заряд ядра $Z_{\text{эфф}}$ и постоянную экранирования a :

$$E_{nl} = -\gamma^2 \cdot \frac{mZ_{\text{эфф}}^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -Rch \frac{Z_{\text{эфф}}^2}{n^2}, \quad (1.13)$$

где R – постоянная Ридберга (м^{-1});

c – скорость света в вакууме;

h – постоянная Планка;

$$Z_{\text{эфф}} = Z - a. \quad (1.14)$$

Анализируя формулы (1.11) и (1.12) видим, что энергия атома щелочного элемента в стационарном состоянии определяется не только значением главного квантового числа n (как у атома водорода и водородоподобных ионов), но и величиной орбитального квантового числа l , то есть имеет место снятие вырождения по l . На схеме энергетических уровней атома натрия (рисунок 1.1) видно, что при заданном значении n с увеличением квантового числа l энергия атома увеличивается.

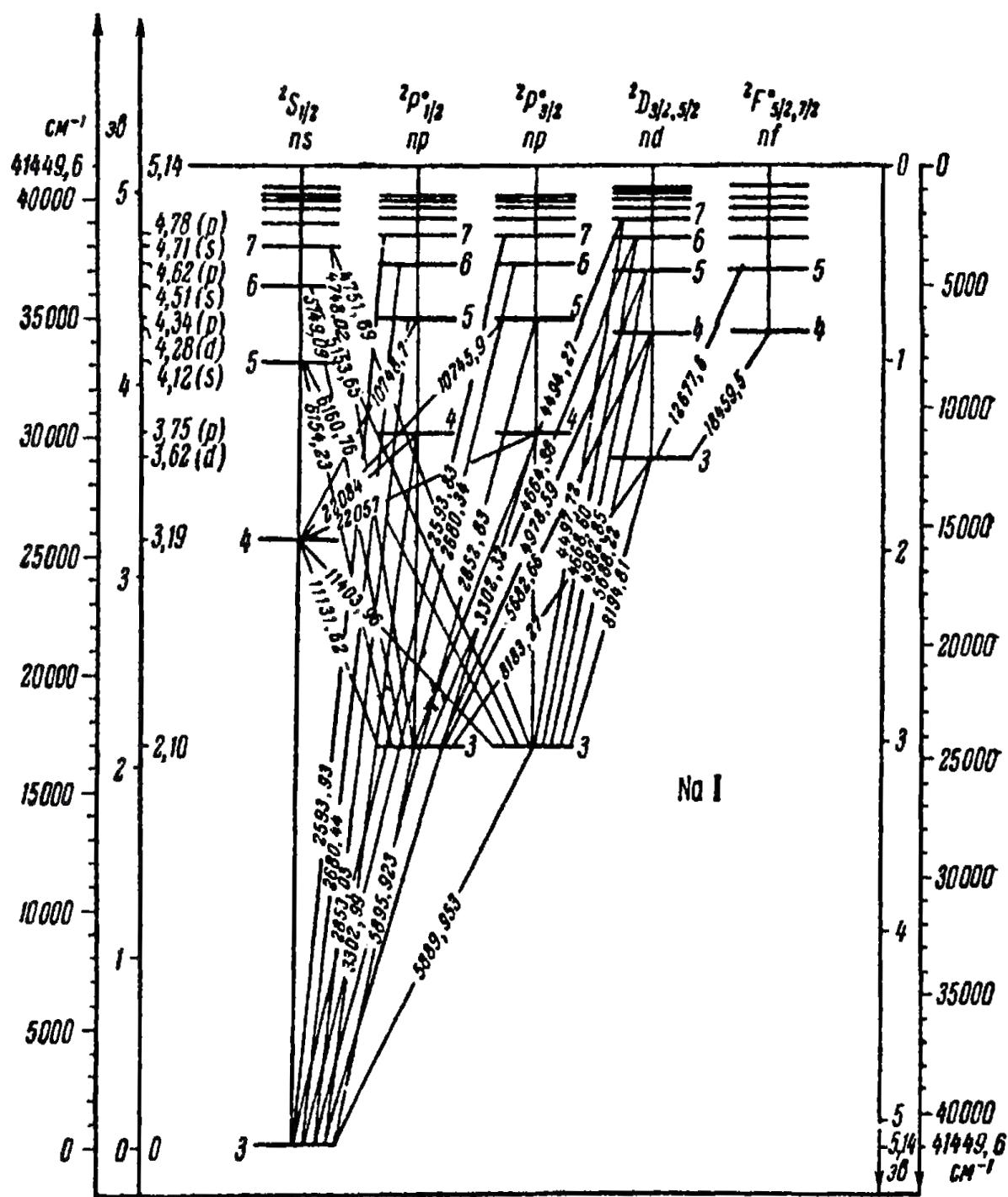


Рисунок 1.1 – Схема энергетических уровней атомов натрия, квантовых переходов в них и соответствующие им длины волн ($\lambda, 10^{-10} \text{ м}$)

При решении задачи о движении электрона в поле центральных сил *в релятивистском приближении* (уравнение Дирака) учитываются наличие спина, спин-орбитальное взаимодействие и релятивистские эффекты. В этом приближении для энергии щелочного атома в стационарном состоянии получено выражение

$$E_{nlj} = E_{nl} + \Delta E_{nlj} = -Rch \frac{Z_{\text{эфф}}^2}{n^2} - \frac{\alpha^2 Rch Z'_{\text{эфф}}^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right), \quad (1.15)$$

где $\alpha = \frac{e^2}{\hbar \cdot c} = \frac{1}{137}$ – постоянная тонкой структуры;

j – внутреннее квантовое число;

$Z'_{\text{эфф}} = Z - a'$ – эффективный заряд ядра.

Поправка a' отличается от постоянной экранирования a , содержащейся в формулах (1.13), (1.14).

Сравнивая формулы (1.13) и (1.15) видим, что при учёте релятивистских эффектов и спин-орбитального взаимодействия в формуле для энергии стационарного состояния появляется добавка ΔE_{nlj} , величина которой зависит от внутреннего квантового числа. Следовательно, указанными факторами обусловлено снятие вырождения по квантовому числу j и наличие тонкой структуры энергетических уровней. В соответствии с двумя возможными значениями j для валентного электрона в атоме щелочного металла ($j_1 = l + 1/2; j_2 = l - 1/2$) каждый энергетический уровень (кроме s -уровня, для которого j принимает единственное значение $j = 1/2$) расщепляется на два подуровня, обуславливая дублетную структуру энергетических уровней. Рассмотренное расщепление энергетических уровней естественным образом проявляется в спектрах испускания и поглощения атомов щелочных элементов в виде тонкой структуры спектральных линий.

Применяя правило частот Бора с учетом формулы (1.15), можно получить следующее выражение для разности частот $\Delta\nu$ компонентов спектрального дублета щелочного элемента:

$$\Delta\nu = \xi_{nl} \frac{1}{n^3 l(l+1)}, \quad (1.16)$$

где

$$\xi_{nl} = Rca^2 Z_{\text{эфф}}^4 \quad (1.17)$$

– постоянная мультиплетного расщепления.

Переходы атомов (в том числе и атомов щелочных металлов) из одного стационарного состояния в другое, сопровождающиеся испусканием или поглощением электромагнитного излучения, подчиняются правилам отбора:

Δn – любое целое число;

$\Delta L = \pm 1$;

$\Delta J = 0, \pm 1$ (кроме переходов $J_i = 0 \rightarrow J_k = 0$).

В спектрах атомов щелочных элементов, в соответствии с этими правилами отбора, наблюдаются следующие основные серии (для определённости рассмотрим атом натрия, электронная конфигурация и спектральный терм которого в основном состоянии имеют вид $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1; {}^2 S_{1/2}$):

– главная серия, состоящая из спектральных линий, соответствующих переходам

$$3s; {}^2 S_{1/2} \rightarrow np; {}^2 P_{3/2};$$

$$3s; {}^2 S_{1/2} \rightarrow np; {}^2 P_{1/2},$$

где $n = 3, 4, 5, \dots$;

– первая побочная (диффузная) серия, обусловленная переходами

$$3p; {}^2 P_{3/2} \rightarrow nd; {}^2 D_{3/2, 5/2};$$

$$3p; {}^2 P_{3/2} \rightarrow nd; {}^2 D_{3/2},$$

где $n = 3, 4, 5, \dots, \infty$;

– вторая побочная (резкая) серия, наблюдаемая при переходах

$$3p; {}^2 P_{3/2} \rightarrow ns; {}^2 S_{1/2};$$

$$3p; {}^2 P_{1/2} \rightarrow ns; {}^2 S_{1/2};$$

где $n = 4, 5, 6, \dots, \infty$;

– серия Бергмана (фундаментальная), относенная к переходам

$$3d; ^2D_{3/2} \rightarrow nf; ^2F_{5/2};$$

$$3d; ^2D_{5/2} \rightarrow nf; ^2F_{5/2,7/2},$$

где $n = 4, 5, 6, \dots, \infty$.

Квантовые переходы, соответствующие формированию перечисленных спектральных серий атома натрия показаны на рисунке 1.1.

1.5. Квантово-механическое описание состояний атома гелия

Уравнение Шрёдингера (1.1) применительно к атому гелия и ионам, содержащим $N = 2$ электрона (Li^+ , Be^{2+} , B^{3+} и т. д.) имеет вид

$$\Delta_1 \psi + \Delta_2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{\gamma Ze^2}{r_1} + \frac{\gamma Ze^2}{r_2} - \frac{\gamma e^2}{r_{12}} \right) \psi = 0, \quad (1.18)$$

где Δ_1 и Δ_2 – операторы Лапласа;

E – полная энергия атома;

$-\frac{\gamma Ze^2}{r_1}$ и $-\frac{\gamma Ze^2}{r_2}$ – потенциальная энергия взаимодействия с ядрами соответственно первого и второго электрона;

$-\frac{\gamma e^2}{r_{12}}$ – потенциальная энергия взаимодействия электронов;

r_{12} – расстояние между электронами.

В нулевом приближении, в котором пренебрегают взаимодействием электронов, уровни энергии и волновые функции состояний рассматриваемых здесь атомных систем определяются в соответствии с формулами

$$E = E_{n1} + E_{n2}, \quad \Psi_n = \psi_{n1} \psi_{n2}, \quad (1.19)$$

$$\text{где } E_n = -\frac{RchZ^2}{n^2} = Z^2 E_H;$$

E_H – энергия атома водорода в нормальном состоянии;

Ψ_n – волновая функция электрона в водородоподобной атомной системе.

Полная энергия двухэлектронной системы в нулевом приближении определяется по формуле

$$E_0 = -2Z^2 E_{\text{H}} = -2RchZ^2. \quad (1.20)$$

При этом отличие от экспериментально найденных значений энергии близко к 40 %.

В *первом приближении* теории возмущений энергия атома гелия в нормальном состоянии вычисляется с учетом среднего значения энергии взаимного отталкивания электронов, которое определяется с использованием функции состояния, полученной в нулевом приближении. Полная энергия двухэлектронной системы в первом приближении теории возмущений вычисляется по формуле

$$E_1 = \left(2Z^2 - \frac{5}{4}Z \right) E_{\text{H}}. \quad (1.21)$$

При использовании этого приближения отличие от экспериментально определяемого значения энергии ионизации атома гелия составляет менее 10 %.

При решении задачи о произвольном состоянии электронов в атоме гелия необходимо учитывать их неразличимость.

Общее нормированное решение уравнения Шрёдингера для атома гелия может быть представлено в виде линейной комбинации (суммы или разности) его частных решений:

– антисимметричного относительно перестановки частиц 1 и 2 по n -ому и m -ому состояниям

$$\Psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_n(1)\Psi_m(2) - \Psi_n(2)\Psi_m(1)], \quad (1.22)$$

– симметричного относительно перестановки частиц 1 и 2 по n -ому и m -ому состояниям

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_n(1)\Psi_m(2) + \Psi_n(2)\Psi_m(1)]. \quad (1.23)$$

Обеим этим функциям соответствует одинаковое значение энергии. При учете энергии взаимного отталкивания электронов вырождение снимается, и двукратно вырожденный уровень энергии расщепляется на два, характеризующиеся энергиями E_a и E_s .

Средняя энергия взаимного отталкивания электронов в атоме гелия

$$\Delta E = \iint |\psi|^2 \frac{\gamma e^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2, \quad (1.24)$$

где $d\tau_1$ и $d\tau_2$ – дифференциалы объёмов, по которым производится интегрирование.

При вычислении средней энергии электростатического отталкивания электронов (1.24) с учетом функций (1.22) и (1.23) получают различные ее значения:

– с учетом функции (1.22)

$$\Delta E_a = C - A, \quad (1.25)$$

– с учетом функции (1.23)

$$\Delta E_a = C + A, \quad (1.26)$$

где

$$C = \iint |\psi_n(1)|^2 |\psi_m(2)|^2 \frac{\gamma e^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 \quad (1.27)$$

– кулоновский интеграл, равный потенциальной энергии отталкивания зарядов $\rho_1 d\tau_1$ и $\rho_2 d\tau_2$, распределенных в пространстве с плотностями $\rho_1 = e|\psi_1^0(1)|^2$ и $\rho_2 = e|\psi_2^0(2)|^2$;

$$A = \frac{1}{2} \iint [\psi_n(1)\psi_m(2)\psi_n^*(2)\psi_m^*(1) + \psi_n(2)\psi_m(1)\psi_n^*(1)\psi_m^*(2)] \times \frac{\gamma e^2}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 \quad (1.28)$$

– интеграл обменного взаимодействия, не имеющий аналога в классической физике, так как он связан с особым квантово-механическим эффектом, обусловленным неразличимостью тождественных частиц (в рассматриваемом атоме гелия – электронов).

Доказано, что $C > 0$, $A > 0$ и $C > A$. Следовательно, $\Delta E_s > \Delta E_a$ и энергетические уровни *парасостояния* лежат выше соответствующих (то есть принадлежащих той же электронной конфигурации) энергетических уровней *ортосостояния*. Таким образом, различие энергетических уровней парасостояния и ортосостояния объясняется обменным взаимодействием.

Его влияние на энергию достаточно велико. Так, электронной конфигурации $1s2s$ соответствуют парасостояние 1S_0 и ортосостояние 3S_1 ; при этом в парасостоянии энергия атома гелия приблизительно на 0,8 эВ больше его энергии в ортосостоянии.

Для полного описания состояния системы электронов атома гелия недостаточно знать волновую функцию (1.22) или (1.23), зависящую от координат обоих электронов. Нужно еще учесть, как ориентированы спины электронов. Состояние электронов описывают полной волновой функцией

$$\Psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\varphi(m_{s1}, m_{s2}),$$

где φ – спиновая волновая функция, зависящая от ориентации спинов электронов, то есть от значений магнитного спинового числа m_s обоих электронов.

Как отмечено выше, имеются две возможности для получения антисимметричной волновой функции системы двух электронов: $\Psi_a^{(1)} = \psi_s \varphi_a$, $\Psi_a^{(2)} = \psi_a \varphi_s$. При этом в одноэлектронном приближении спиновая функция системы двух электронов $\varphi(m_{s1}, m_{s2})$ строится из одноэлектронных спиновых функций $\varphi^+(\sigma)$ и $\varphi^-(\sigma)$, где $\varphi^+(m_s)$, соответствует состоянию электрона, в котором проекция его спина равна $+\frac{\hbar}{2}$, а $\varphi^-(m_s)$ – состоянию, в котором проекция спина равна $-\frac{\hbar}{2}$. Из этих функций можно составить три двухэлектронные спиновые функции, симметричные относительно перестановки электронов:

$$\begin{aligned} \varphi_s^{(1)} &= \varphi^+(m_{s1})\varphi^+(m_{s2}); \\ \varphi_s^{(2)} &= \varphi^+(m_{s1})\varphi^-(m_{s2}) + \varphi^-(m_{s1})\varphi^+(m_{s2}); \\ \varphi_s^{(3)} &= \varphi^-(m_{s1})\varphi^-(m_{s2}), \end{aligned} \quad (1.29)$$

и одну антисимметричную –

$$\varphi_a = \varphi^+(m_{s1})\varphi^-(m_{s2}) - \varphi^-(m_{s1})\varphi^+(m_{s2}). \quad (1.30)$$

Функции $\varphi_s^{(1)}$, $\varphi_s^{(2)}$, $\varphi_s^{(3)}$ описывают спиновые состояния двухэлектронной системы с проекциями S_z суммарного спина $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$, равными, соответственно $+\hbar$, 0 , $-\hbar$, то есть в совокупности описывает состояние со

спиновым числом $S = 1$ (триплетное состояние, $\kappa = 3$). Антисимметрическая спиновая функция φ_a описывает состояние с единственным значением $S_z = 0$, то есть соответствует синглетному состоянию ($\kappa = 1$) со спином $S = 0$.

Учитывая, что антисимметричная спиновая функция сочетается с симметрической функцией пространственных координат и наоборот, можно сделать важный вывод: *пара* состояния характеризуются спиновым квантовым числом $S = 0$ (их термы *синглетны*), а *ортосостояния* – спиновым квантовым числом $S = 1$ (их термы *триплетны*).

Энергетически наиболее выгодной для атома гелия является электронная конфигурация $1s^2$ (рисунок 1.2); именно она соответствует нормальному состоянию атома гелия. Для этой конфигурации возможен единственный синглетный терм 1S_0 ($L = 0$, $S = 0$, $\kappa = 1$). Атом гелия в этом состоянии не имеет магнитного момента (диамагнетен). То, что конфигурации $1s^2$ соответствует только пара состояния, является прямым следствием принципа Паули.

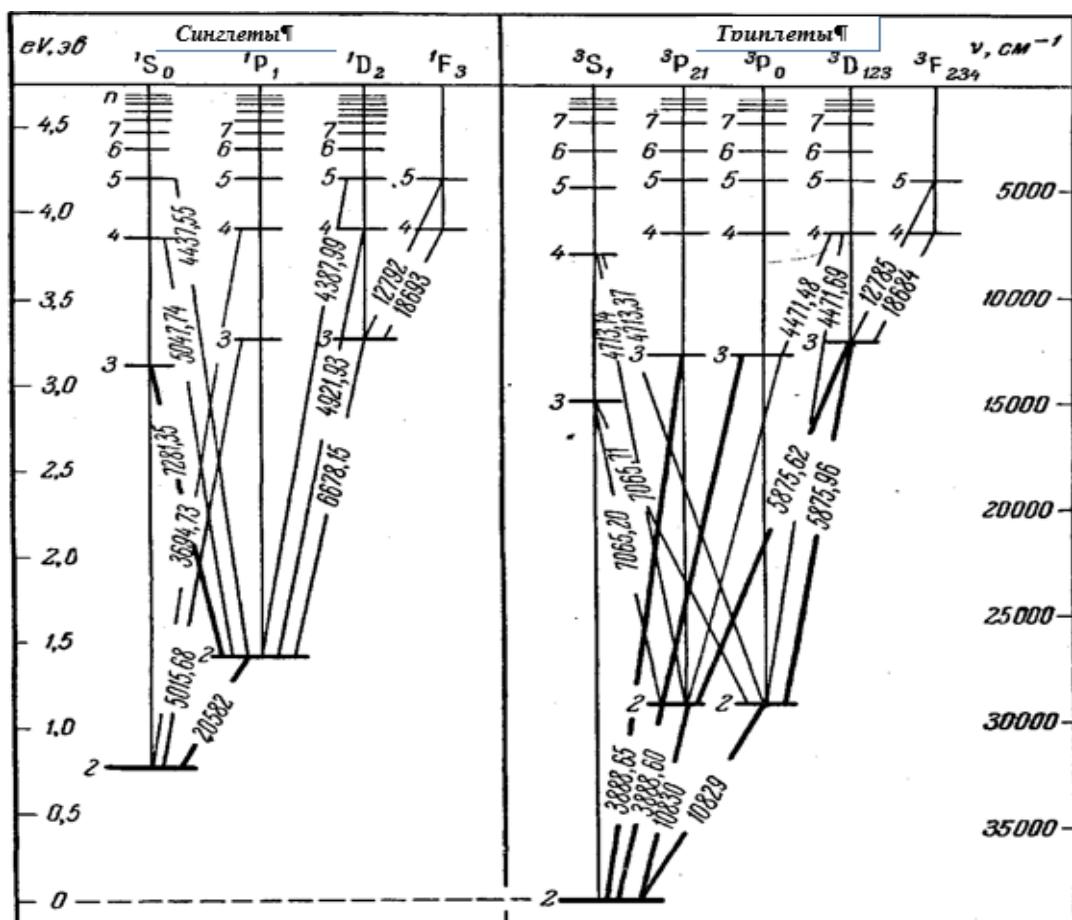


Рисунок 1.2 – Диаграмма энергетических уровней атома гелия
в синглетных и триплетных состояниях
(без учета спин-орбитального взаимодействия и без соблюдения масштаба)

Следующей по энергии является электронная конфигурация $1s2s$. Ей соответствуют два терма: 1S_0 (парагелий) и 3S_1 (ортогелий). Из-за обменного взаимодействия терм $1s2s\ ^1S_0$ лежит выше терма $1s2s\ ^3S_1$. Терму $1s2s\ ^1S_0$ соответствует одно состояние и, следовательно, один уровень энергии, а терму $1s2s\ ^3S_1$ – три состояния, различающиеся проекциями полного момента, характеризуемого квантовым числом $J = 1$ и совпадающего в данном случае со спиновым моментом. В отсутствие внешних полей этим трем состояниям соответствует один уровень энергии. Однако, при наличии внешнего магнитного поля этот уровень «расщепляется» на три. Электронной конфигурации $1s2p$ соответствуют два терма: синглетный терм 1P_0 (для парагелия) и триплетный $^3P_{0,1,2}$ (для ортогелия). Последнему в отсутствие внешних полей соответствуют три уровня: 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 . Различие энергий в этих состояниях обусловлено спин-орбитальным взаимодействием. Однако в атоме гелия спин-орбитальному взаимодействию соответствует небольшая по величине энергия, и расщепление термов и спектральных линий атома гелия относительно невелико. Триплетный терм характеризуется в соответствии с правилом Гунда меньшей энергией, чем соответствующий синглетный. Результаты произведённого анализа проиллюстрированы на рисунке 1.2, где изображена диаграмма энергетических уровней атома гелия в орто- и парасостояниях. Используя эту диаграмму и учитывая правила отбора для разрешённых переходов, можно объяснить спектр атома гелия. Разность энергий синглетного и соответствующего триплетного термов уменьшается по мере увеличения энергии возбуждения (таблица 1.1).

Таблица 1.1 – Разности волновых чисел, соответствующих синглетным и триплетным состояниям атома гелия (см^{-1})

n	$^1S - ^3S$	$^1P - ^3P$	$^1D - ^3D$	$^1F - ^3F$
2	6421,38	2047,89	–	–
3	1627,98	644,60	3,32	–
4	642,04	275,53	1,88	0,63
5	316,45	141,68	1,06	1,48
6	178,71	81,96	0,65	0,12
7	110,56	51,69	0,31	0,11
8	73,24	34,48	0,31	0,12
9	50,76	24,27	0,14	0,06

Для атома гелия выполняются обычные правила отбора, имеющие место для дипольного излучения: разрешены переходы, при которых

$\Delta L = \pm 1$, $\Delta J = 0, \pm 1$ (кроме переходов между состояниями, для которых $J_n = J_m = 0$). Новым (по сравнению с атомом водорода и щелочными металлами) является правило отбора, в соответствии с которым $\Delta S = 0$ и запрещены *интеркомбинационные переходы*, то есть переходы между синглетными и триплетными термами.

В спектрах поглощения и испускания гелия регистрируются два набора линий: один, соответствующий синглет – синглетным (спектр параллелия), и другой, соответствующий триплет – триплетным квантовым переходам (спектр ортогелия).

Структура спектров, аналогичная спектру атома гелия, характерна для изоэлектронных атому гелия атомных систем: однократно ионизированного атома лития Li II, двукратно ионизированного атома бериллия Be III, трехкратно ионизированного атома бора B IV и других. Энергия возбуждения и энергия ионизации ионов элементов, в поле ядра которых движутся два электрона, значительно увеличивается с ростом зарядового числа ядра Z .

Вопросы для самоконтроля

1. Какова структура уравнения Шрёдингера для стационарных состояний многоэлектронного атома?
2. Какими физическими величинами характеризуют состояние электрона в атоме? Каковы правила квантования этих величин?
3. Какие значения могут принимать квантовые числа n , l , m_l , m_s характеризующие состояние электрона в атоме?
4. Какими положениями следует руководствоваться при определении порядка заполнения квантовых состояний электронами в сложном атоме?
5. Что называют электронной конфигурацией атома?
6. Каковы алгоритмы определения полного момента импульса \vec{J} сложного атома в соответствии с векторной моделью: а) нормальной связи; б) $\vec{j} - \vec{j}$ -связи?
7. Как определяют спектроскопическое обозначение состояния (спектрального терма) многоэлектронного атома с нормальным типом связи? Приведите примеры.
8. Сформулируйте правила Хунда.
9. В чём суть модели валентного электрона (эффективного ядра)? Как на её основе определяется энергия стационарного состояния атома щелочного металла?
10. Как определяется энергия атома гелия в основном и возбужденных состояниях?

11. В чём суть спин-орбитального взаимодействия? Как оно проявляется в спектрах атомов щелочных металлов и в спектрах атома гелия?

12. В соответствии с какими правилами отбора реализуются дипольные переходы в сложных атомах?

13. Какие термы атомов щелочных металлов можно комбинировать друг с другом? Каков ответ на этот вопрос применительно к атому гелия?

14. Каковыserialные закономерности в спектрах атомов щелочных металлов? Каковы они в спектре атома гелия и атомных систем, изоэлектронных гелию?

15. Какими факторами объясняется уменьшение длины волны резонансной линии при увеличении атомного номера Z в ряду атомных систем, изоэлектронных атому Не I?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 1. ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ СЛОЖНОГО АТОМА НА ОСНОВЕ ВЕКТОРНОЙ МОДЕЛИ РАССЕЛА – САУНДЕРСА

Цель работы: изучить основные положения теории электронного строения сложного атома и правила отбора в дипольном приближении; научиться применять изученный материал, решая частные задачи (в соответствии с номером варианта, указанным преподавателем).

Принадлежности: учебное пособие «Физика атома и атомных явлений» (авторы А. Н. Годлевская, В. Г. Шолох; 2017), условия заданий.

Задание 1. Определение электронной конфигурации многоэлектронного атома

1. Считая применимым одноэлектронное приближение для определения состояния невозбужденного атома, которому соответствует зарядовое число Z (таблица 1.2), определите возможные наборы квантовых чисел n , l , m_l , m_s для каждого электрона и занесите их в таблицу 1.2 в порядке возрастания энергии. Сформулируйте правила, которыми вы руководствуетесь при выполнении задания, вариант которого из имеющихся в таблице 1.3 указывает преподаватель.

Таблица 1.2 – Квантовые числа электронов атома _____

Условный номер электрона	n	l	m_l	m_s
1				
...				

Таблица 1.3 – Дополнительная информация для конкретизации заданий в соответствии с их вариантами

Номер задания	Вариант							
	1	2	3	4	5	6	7	8
1	$Z=7$	$Z=9$	$Z=12$	$Z=14$	$Z=15$	$Z=22$	$Z=31$	$Z=32$
2	$s^2 p^5$	p^4	$s^2 p^2$	$s^2 p$	p^3	d^2	$d s^2$	$d^9 s$
3	$2^{1/2} S_{1/2}, 3^{2} S_{1/2}, 3^{2} P_0,$ $2^{1} P_{3/2}, 3^{3} P_0,$ $2^{2} D_{5/2}, 3^{2} D_{3/2},$ $2^{3} F_3$	$3^{2} S_{0}, 2^{3} S_{1},$ $3^{2} F_{5/2}, 4^{5} D_{1/2},$ $4^{3} P_1, 2^{1} F_2,$ $7^{3} G_3$	$4^{3} P_0, 2^{2} D_2,$ $3^{0} S_0, 4^{5} D_{1/2},$ $4^{3} P_1, 2^{1} F_2,$ $3^{4} F_{3/2}$	$2^{2} P_{3/2}, 2^{2} S_1,$ $5^{1} F_4, 3^{2} P_{5/2},$ $4^{3} D_2, 5^{3} P_1$	$6^{4} S_{3/2}, 4^{4} F_{3/2},$ $2^{1} S_0, 5^{4} F_{9/2},$ $2^{3} P_0, 3^{3} D_{3/2},$ $3^{5} D_4$	$2^{2} P_{3/2}, 8^{1} G_4,$ $3^{2} S_1, 4^{2} F_{5/2},$ $5^{4} F_5, 3^{2} D_2$	$2^{2} P_{3/2}, 4^{5} D_4$	$2^{2} P_{3/2}, 4^{3} P_{5/2},$ $3^{3} S_0, 5^{3} F_4,$ $4^{3} F_{9/2}$
4	$2 F_4 \leftrightarrow 3 D_1;$ $2 F_4 \leftrightarrow 3 G_5;$ $2 S_{3/2} \leftrightarrow 2 P_{3/2};$ $2 P_{3/2} \leftrightarrow 2 P_{3/2};$ $2 P_{3/2} \leftrightarrow 4 P_{1/2};$ $4 S_{3/2} \leftrightarrow 4 P_{3/2};$ $4 P_{3/2} \leftrightarrow 4 P_{7/2};$ $4 D_{5/2} \leftrightarrow 4 F_{7/2};$ $1 F_3 \leftrightarrow 1 F_4;$ $4 S_{3/2} \leftrightarrow 4 P_{3/2};$ $4 P_{3/2} \leftrightarrow 4 D_{5/2}$	$1 G_4 \leftrightarrow 1 S_0;$ $3 S_1 \leftrightarrow 3 P_1;$ $4 P_{3/2} \leftrightarrow 2 P_{3/2};$ $2 P_{3/2} \leftrightarrow 2 D_{5/2};$ $2 P_{1/2} \leftrightarrow 2 D_{3/2};$ $1 S_0 \leftrightarrow 3 P_0;$ $3 D_3 \leftrightarrow 3 F_3;$ $4 P_{1/2} \leftrightarrow 4 D_{7/2};$ $4 G_{11/2} \leftrightarrow 4 F_{9/2}$	$2 S_{1/2} \leftrightarrow 2 D_{5/2};$ $1 F_3 \leftrightarrow 3 D_2;$ $3 P_0 \leftrightarrow 3 F_4;$ $2 P_{3/2} \leftrightarrow 2 D_{5/2};$ $2 P_{1/2} \leftrightarrow 2 D_{3/2};$ $1 S_0 \leftrightarrow 3 P_0;$ $3 F_3 \leftrightarrow 3 D_1;$ $4 F_{9/2} \leftrightarrow 4 F_{7/2}$	$2 F_{5/2} \leftrightarrow 2 P_{1/2};$ $2 F_{5/2} \leftrightarrow 2 P_{3/2};$ $4 P_{1/2} \leftrightarrow 4 S_{3/2};$ $2 P_{5/2} \leftrightarrow 4 D_{7/2};$ $1 F_3 \leftrightarrow 1 D_2;$ $1 G_4 \leftrightarrow 3 F_3;$ $2 P_{1/2} \leftrightarrow 2 D_{5/2}$	$4 D_{5/2} \leftrightarrow 4 P_{1/2};$ $3 P_1 \leftrightarrow 3 F_2;$ $2 P_{5/2} \leftrightarrow 4 D_{3/2};$ $4 P_{1/2} \leftrightarrow 4 D_{3/2};$ $1 G_4 \leftrightarrow 3 P_1;$ $3 D_3 \leftrightarrow 3 F_4;$ $4 S_{3/2} \leftrightarrow 4 D_{3/2}$	$4 F_{5/2} \leftrightarrow 4 G_{7/2}$	$2 D_{5/2} \leftrightarrow 2 G_{3/2};$ $3 D_3 \leftrightarrow 3 F_3;$ $4 P_{3/2} \leftrightarrow 4 F_{5/2};$ $4 D_{3/2} \leftrightarrow 2 P_{3/2};$ $2 P_{3/2} \leftrightarrow 2 P_{1/2};$ $3 P_0 \leftrightarrow 3 D_2$	$2 D_{5/2} \leftrightarrow 2 G_{3/2};$ $3 D_3 \leftrightarrow 3 F_3;$ $4 P_{3/2} \leftrightarrow 4 F_{5/2};$ $4 D_{3/2} \leftrightarrow 2 P_{3/2};$ $2 P_{3/2} \leftrightarrow 2 P_{1/2};$ $3 P_0 \leftrightarrow 3 D_2$

2. Используя спектроскопические обозначения, запишите электронную конфигурацию атома в основном состоянии.

Задание 2. Определение возможных спектральных термов атома на основе его электронной конфигурации

1. Запишите правила, в соответствии с которыми определяют возможные значения квантовых чисел L , S , J , характеризующих состояние многоэлектронного атома.

2. Обосновывая свои действия, определите спектроскопические обозначения возможных состояний атома, имеющего заданную электронную конфигурацию (таблица 1.3).

3. Применяя правила Хунда, расположите состояния атома в порядке возрастания энергии.

Задание 3. Выбор возможных состояний многоэлектронного атома на основе анализа спектроскопического обозначения терма

1. Определите значения квантовых чисел L , S , J , на основе спектроскопических обозначений состояний, указанных в предложенном вам варианте (таблица 1.3).

2. Определите, какие из этих состояний, возможны. Обоснуйте своё решение.

Задание 4. Анализ возможности излучательного квантового перехода между заданными состояниями атома

1. Запишите правила отбора, которые должны выполняться при изменении состояния атома, сопровождающемся испусканием или поглощением электромагнитного излучения.

2. Определите, возможны ли исходное и конечное состояния в переходах, указанных в условии (таблица 1.3).

3. Определите, какие из переходов, связывающих возможные состояния, разрешены. Ответ обоснуйте.

4. Обобщите результаты выполнения заданий 1–4, составляя отчет о работе.

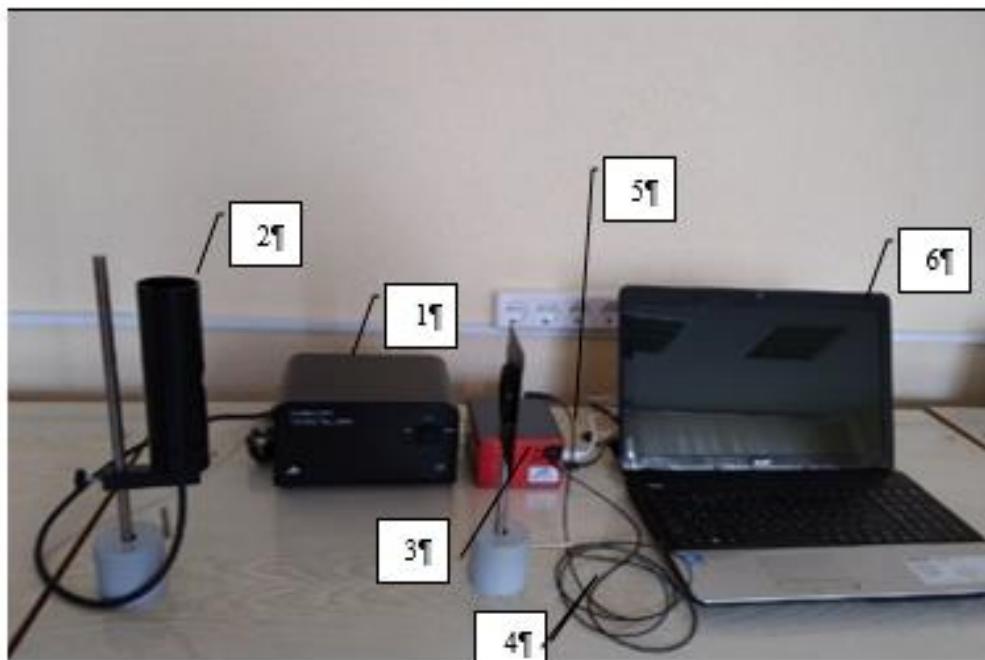
ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 2. ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ АТОМА НАТРИЯ

Цель работы: изучение основных закономерностей электронного строения и спектров щелочных металлов; определение величины дублетного расщепления спектральных термов, эффективного заряда и постоянной экранирования для атома натрия.

Приборы и принадлежности: экспериментальная установка для регистрации спектра испускания атомов натрия в видимой области, схема энергетических уровней натрия.

Задание 1. Изучение устройства и принципа работы экспериментальной установки

Для регистрации спектра испускания атомов натрия в видимой области длин волн используется установка, изображение которой приведено на рисунке 1.3.



- 1 – источник питания;
- 2 – газоразрядная натриевая лампа в кожухе;
- 3 – вход волновода в держателе;
- 4 – волновод;
- 5 – спектрометр HD;
- 6 – ноутбук или стационарный компьютер

Рисунок 1.3 – Внешний вид установки для изучения спектра испускания атомов натрия

Натриевая газоразрядная лампа 2 подключена к левому выходу источника питания 1 и включается посредством нажатия на левую сторону клавиши, расположенной на лицевой панели источника питания. Электромагнитное излучение, испускаемое атомами натрия в газоразрядной трубке и выходящее через отверстие в её кожухе, падает на входной торец 3 волновода 4 и передаётся по нему на входное отверстие спектрометра 5. В спектрометре осуществляется разложение электромагнитного излучения в спектр, преобразование энергии излучения в энергию электрического аналогового сигнала с последующим преобразованием его в цифровой сигнал. Посредством встроенной компьютерной программы «Spectrosoftware» информация о распределении относительной интенсивности излучения, испускаемого атомами натрия, по длинам волн в пределах видимой области выводится на монитор ноутбука 6.

Задание 2. Определение локализации компонентов дублетной структуры спектра атома натрия в видимой области

1. Подключите к сети с напряжением 220 В источник питания 1, спектрометр 5 и ноутбук 6.
2. Включите ноутбук.
3. Для включения газоразрядной лампы нажмите на левый край клавиши, расположенной на лицевой панели источника питания 1.
4. В меню ноутбука выберите диск «Spectrosoftware» и откройте его. На экране монитора появится изображение рабочего окна указанной программы рисунок 1.4.

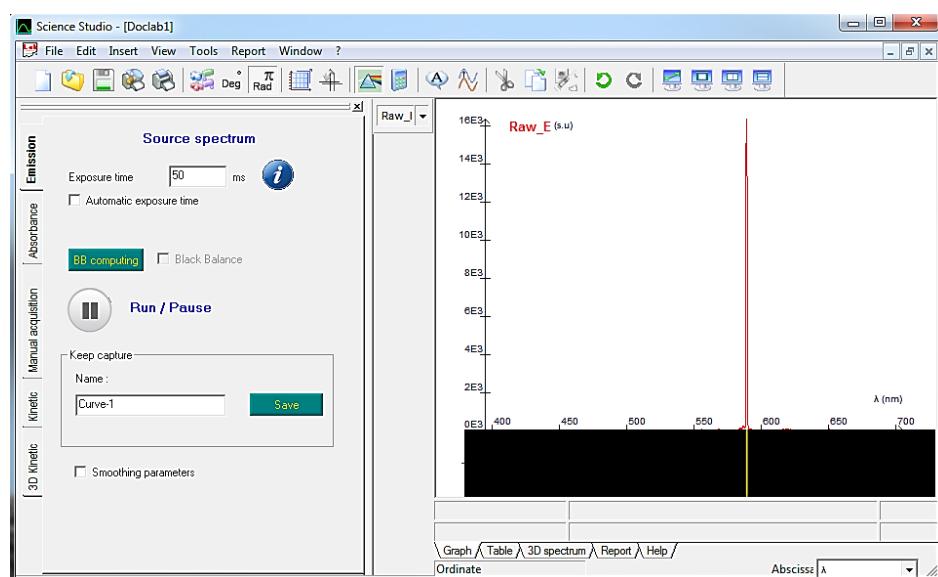


Рисунок 1.4 – Рабочее окно программы «Spectrosoftware»

5. На панели, расположенной в левой части окна, снимите флажок в окошке «*Automatic exposure time*» и установите длительность экспозиции сигнала в пределах (50–500 мс) в окошке «*Exposure time*».

6. Отрегулируйте взаимное расположение газоразрядной лампы и входного отверстия волновода, а также длительность экспозиции таким образом, чтобы контур графика распределения интенсивности всех исследуемых спектральных линий не выходил за пределы градуированной части вертикальной оси.

7. Выберите в спектре один из дублетов атома натрия.

Нажатием правой клавиши мыши откройте контекстное меню и выберите опцию «*Zoom*», кликните на поле спектра и при зажатой левой клавише мыши выделите необходимый участок спектра. В рабочем окне появится изображение выделенного участка спектра в увеличенном масштабе (рисунок 1.5). Наведите появившийся курсор на один из двух максимумов исследуемого дублета. Значение длины волны λ_1 , которое при этом появится на горизонтальной шкале под спектральным распределением, занесите в таблицу 1.5.

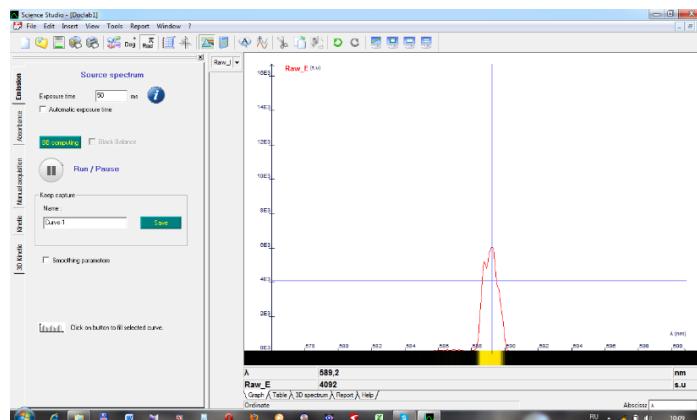


Рисунок 1.5 – Увеличенное изображение фрагмента спектра натрия

Таблица 1.5 – Результаты эксперимента и расчёта параметров атома натрия в модели эффективного ядра

Переход в атоме	λ_1	λ_2	$\Delta\nu$	ξ_{nl}	$Z_{\text{эфф}}$	a

8. Скопируйте изображение рабочего окна для размещения его в отчёте.

9. Повторите действия 6–8 в отношении второго компонента дублета и запишите в таблицу 1.4 значение длины волны λ_2 .

10. Откройте контекстное меню программы нажатием правой клавиши мыши и выберите опцию «*Normal zoom*». На экране монитора появится исходное изображение спектра натрия (рисунок 1.4).

11. Повторите действия 10, 6–8 в отношении спектральных линий других дублетов атома натрия.

12. Изучите закономерности построения схемы энергетических уровней атома натрия (рисунок 1.1), выделите на ней пары переходов, соответствующие обнаруженным вами дублетам из разных спектральных серий, и запишите в соответствующие строки таблицы 1.5 их спектроскопические обозначения.

Задание 3. Определение постоянной экранирования

1. Вычислите разность частот $\Delta\nu$ для дублетов из спектра атома натрия, использованных при выполнении задания 2, по формуле

$$\Delta\nu = c \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2} \right). \quad (1.31)$$

2. Используя найденные значения $\Delta\nu$ и формулу

$$\Delta\nu = \xi_{nl} \frac{1}{n^3 l(l+1)}, \quad (1.32)$$

вычислите значения постоянной мультиплетного расщепления ξ_{nl} , учитывая значения квантовых чисел n , и l , соответствующие каждому рассматриваемому дублету.

3. Сравните значения ξ_{nl} , рассчитанные с использованием информации о разных спектральных дублетах. Сформулируйте аргументированный вывод.

4. Пользуясь формулой

$$\xi_{nl} = R c \alpha^2 Z'_{\text{эфф}}^4, \quad (1.33)$$

где $Z'_{\text{эфф}}$ – эффективный заряд ядра атома;

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar \cdot c} = \frac{1}{137} \text{ – постоянная тонкой структуры;}$$

R – постоянная Ридберга;

определите значения $Z'_{\text{эфф}}$ и полученные результаты занесите в таблицу 1.5.

5. Учитывая, что

$$Z'_{\text{эфф}} = Z - a' , \quad (1.34)$$

определите значения постоянной экранирования a' .

6. Сопоставьте результаты, полученные с использованием различных дублетов. Истолкуйте физический смысл полученных результатов.

Задание 4. Определение величины дублетного расщепления уровней энергии для атома натрия

1. Для каждого компонента дублета рассчитайте величину смещения уровней энергии, обусловленного спин-орбитальным взаимодействием, пользуясь формулой

$$\Delta E_{nlj} = -\frac{\alpha^2 R c h Z'^4}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right), \quad (1.35)$$

где j – внутреннее квантовое число.

2. Определите полную ширину тонкой структуры уровня $\Delta E_{nl} = |\Delta E_{nlj_1} - \Delta E_{nlj_2}|$.

3. Результаты, полученные при выполнении пп. 1 и 2, занесите в таблицу 1.6.

Таблица 1.6 – Результаты расчёта тонкой структуры уровней

Квантовый переход	ΔE_{nlj_1} , Дж	ΔE_{nlj_2} , Дж	ΔE_{nl} , Дж

5. Обобщите результаты выполнения заданий. Сформулируйте выводы, соответствующие целям лабораторной работы.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 3.

ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ

АТОМА ГЕЛИЯ И ИЗОЭЛЕКТРОННЫХ ЕМУ

АТОМНЫХ СИСТЕМ

Цель работы: изучить спектральные закономерности и электронное строение атомных систем, которым в основном состоянии соответствует электронная конфигурация ns^2 .

Приборы и принадлежности: монохроматор УМ-2, ртутная лампа ДРШ-250 с блоком питания, гелиевая газоразрядная трубка с блоком питания, атлас спектральных линий ртути, программное приложение *The Elements Spectra*.

Задание 1. Экспериментальное изучение спектра и электронного строения атома гелия

1. Включите ртутную лампу и – после стабилизации её свечения – произведите юстировку осветительной системы.
2. Изменяя ширину входной щели монохроматора УМ-2 и фокусировку его окуляра, получите качественное изображение спектра ртути.
3. Пользуясь атласом спектра ртути, произведите градуировку шкалы барабана монохроматора. Постройте график зависимости $\lambda = f(n)$.
4. Установите перед входной щелью монохроматора гелиевую газоразрядную трубку, по шкале прибора определите положение спектральных линий атома гелия, наблюдаемых в видимой области спектра. Пользуясь графиком $\lambda = f(n)$, определите соответствующие им длины волн.
5. Изучите электронное строение атома гелия (рисунок 1.2). Произведите сопоставление спектральных линий электронным переходам между состояниями атома и сгруппируйте их в серии.
6. Постройте фрагмент схемы термов атома гелия и укажите на этом чертеже электронные переходы, соответствующие наблюдаемым спектральным линиям.
7. Пользуясь сведениями, приведенными в таблице 1.7, найденными экспериментально значениями длин волн и комбинационным принципом Ритца, определите числовые значения термов возбуждённых состояний, отображённых на фрагменте схемы. Определите значения соответствующих им постоянных экранирования a .
8. Сформулируйте выводы относительно степени экранирования ядра в возбужденных состояниях атома гелия.

Таблица 1.7 – Характеристики энергетических состояний атомных систем, изоэлектронных атому гелия

Атомная система	He I	Li II	Be III	B IV	C V	N VI	O VII
Длина волны, соответствующая резонансному переходу $1s^2 \ ^1S_0 \leftrightarrow \leftrightarrow 1s2p \ ^1P_1$, λ , нм	58,43	19,93	10,03	6,03	4,03	2,88	2,16
Энергия ионизации, эВ	24,58	75,62	153,85	259,30	391,99	551,93	739,11
Значение терма $1s^2 \ ^1S_0$, см^{-1}	198305	610079	1241225	2091960	3162450	4452800	5963000
Зарядовое число Z	2	3	4	5	6	7	8
Эффективный заряд ядра Z^*	1,35	2,36	3,36	4,37	5,37	6,37	7,38
Постоянная экранирования a	0,65	0,64	0,64	0,63	0,63	0,63	0,62

Задание 2. Изучение спектров атомных систем, изоэлектронных атому гелия

1. Воспользуйтесь компьютерной моделью эмиссионных спектров атомных систем **«The Elements Spectra»**, рабочее окно которой изображено на рисунке 1.6.

2. Выберите в периодической системе элементов, отображенной в рабочем окне, символ Не, а в окне **«Stage of Ionization»** – позицию **«I (Neutral)»**. При этом в рабочем окне программы будут отображены спектры поглощения (*Absorbtion*) и испускания (*Emission*) атомарного гелия в видимой области. Изучите спектральные закономерности при визуальном наблюдении и анализе компьютерной имитации спектра атомарного гелия, изображенного в окне **«Emission Spectra»**.

3. Перемещая курсор в окне **«Emission Spectra»**, определите длины волн, соответствующие линиям эмиссионного спектра атома гелия, и сравните их с экспериментально найденными значениями. При необходимости дополните экспериментально полученную таблицу значений длин волн гелия.

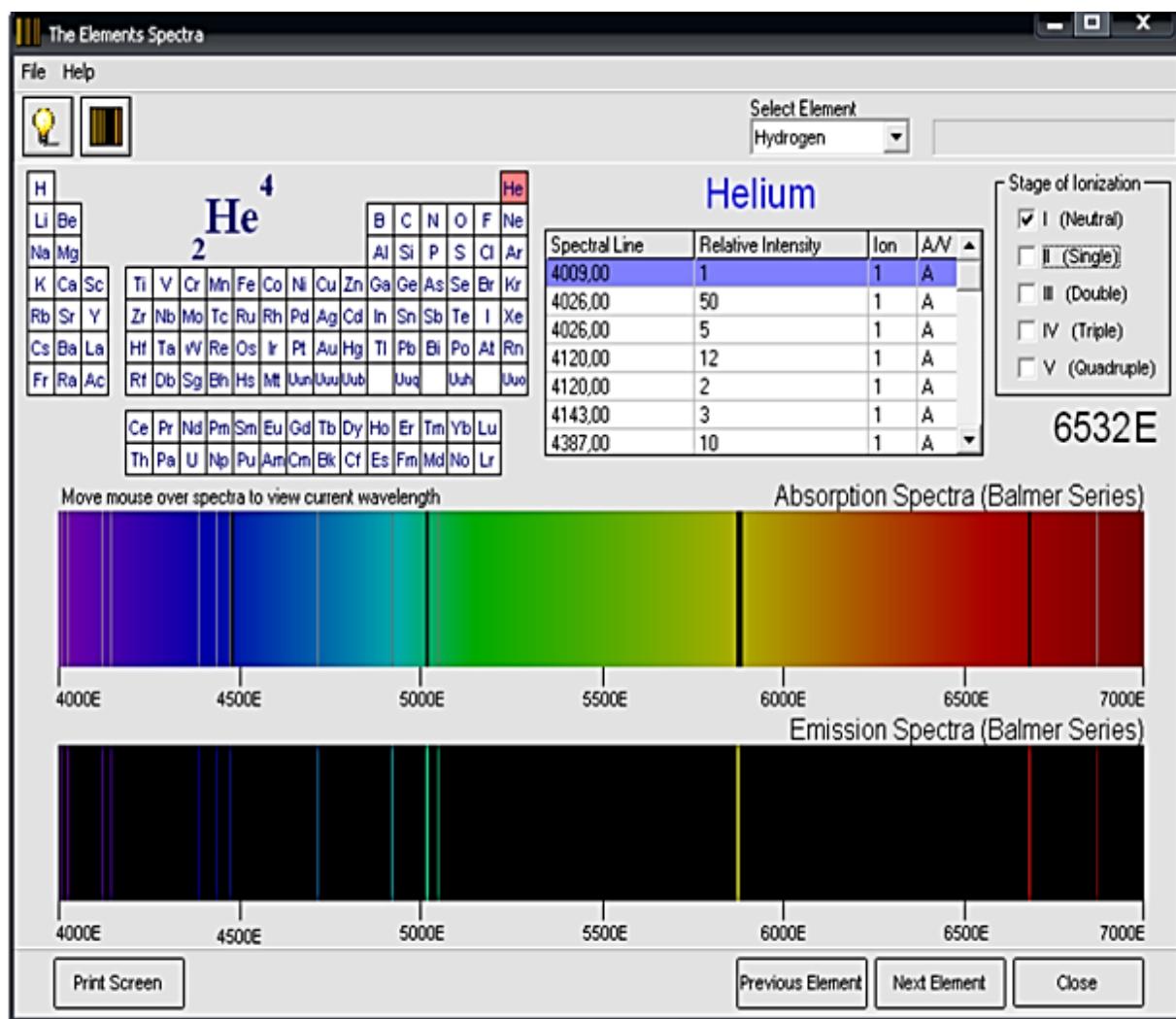


Рисунок 1.6 – Рабочее окно компьютерной программы «The Elements Spectra»

1. Выберите в периодической системе элементов, отображенной в рабочем окне, символ Li, а в окне «*Stage of Ionization*» – позицию «**II (Single)**». Визуально изучите спектральные закономерности в компьютерной имитации спектра испускания однократно ионизированного атома лития Li II, изображенного в окне «*Emission Spectra*».

2. Перемещая курсор в окне «*Emission Spectra*», определите длины волн линий эмиссионного спектра иона Li II. Учитывая масштаб шкалы волновых чисел (таблица 1.7) применительно к синглет – синглетным переходам и пользуясь схемой энергетических уровней атома гелия (рисунок 1.2), определите, каким переходам соответствуют зарегистрированные в компьютерной имитации спектральные линии Li II.

3. Повторите действия, описанные в п. 5, применительно к другим изоэлектронным атому гелия атомным системам, перечисленным в таблице 1.7.

4. Сформулируйте выводы. Оформите отчет о работе.

ТЕМА 2. РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ АТОМОВ

В исследовании строения атома (в частности, распределения электронов по оболочкам) большое значение имеют данные о спектрах рентгеновского излучения.

Рентгеновское излучение возникает при бомбардировке вещества потоками электронов с большой кинетической энергией. Источник рентгеновского излучения – рентгеновская трубка – состоит из трех частей (рисунок 2.1): баллона *B* (стеклянного или металлического), катода *K*, являющегося источником электронов и представляющим собой проволоку, накаливаемую электрическим током, и анода *A*, являющегося источником рентгеновского излучения.

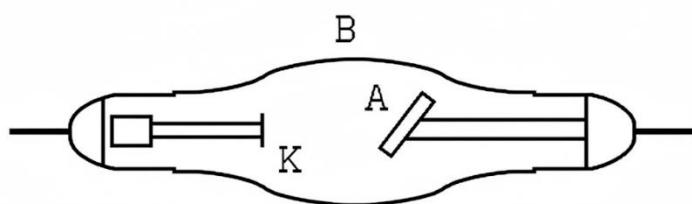


Рисунок 2.1 – Устройство рентгеновской трубы

Между катодом и анодом создается электрическое поле, ускоряющее электроны. Приобретая кинетическую энергию

$$E_k = eV, \quad (2.1)$$

электроны попадают на анод. В формуле (2.1) *V* – разность потенциалов между анодом и катодом, *e* – модуль заряда электрона.

Торможение электронов в веществе анода и их взаимодействие с его структурными элементами сопровождаются испусканием рентгеновского излучения. Для возбуждения рентгеновского излучения электрон должен иметь энергию порядка десятков тысяч электрон-вольт. Чтобы избежать потерь энергии в результате столкновения электронов с атомами газа, газ из баллона рентгеновской трубы откачивается до давления $p \sim 10^{-6}$ мм рт. ст.

Рентгеновское излучение производит сильное фотографическое действие, возбуждает люминесценцию ряда веществ, способно ионизировать атомы и проникать вглубь вещества. На использовании этих свойств основано обнаружение рентгеновского излучения и измерение его интенсивности.

Спектры рентгеновского излучения имеют сложную структуру, которая зависит как от энергии электронов, так и от вещества анода. На рисунке 2.2 приведен фрагмент типичного спектрального распределения интенсивности рентгеновского излучения. Спектр испускания представляет совокупность нескольких монохроматических линий (им соответствуют длины волн λ_1 , λ_2 , ...), имеющих вид острых пиков на фоне непрерывного спектра.

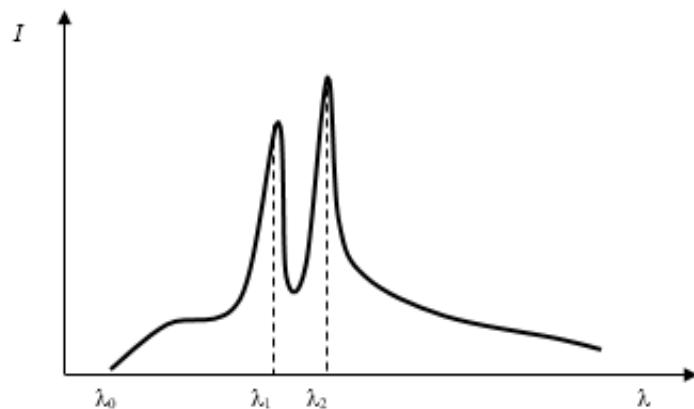


Рисунок 2.2 – Типичное спектральное распределение интенсивности в рентгеновском спектре испускания

Электромагнитное излучение, соответствующее острым пикам интенсивности, положение которых зависит только от природы вещества анода, называют *характеристическим рентгеновским излучением*, а совокупность длин волн, соответствующих максимумам интенсивности, составляет *линейчатый рентгеновский спектр* вещества анода.

Характер непрерывного (сплошного) спектра не зависит от вещества анода, а зависит от кинетической энергии бомбардирующих его электронов. На этом основании было сделано предположение, что непрерывный спектр излучается электронами пучка при их торможении веществом. По этой причине *сплошной рентгеновский спектр* называют *тормозным спектром*.

При торможении электрона только часть его энергии превращается в энергию рентгеновского излучения. Максимальная энергия кванта рентгеновского излучения, испускаемого при торможении электрона атомами вещества анода, соответствует процессу, при котором вся кинетическая энергия электрона преобразуется в энергию одного кванта (рентгеновского фотона). В такой ситуации выполняется соотношение

$$h\nu_0 = eV, \quad (2.2)$$

где ν_0 – частота, соответствующая коротковолновой границе сплошного рентгеновского спектра.

При этом граничная длина волны (рисунок 2.2)

$$\lambda_0 = \frac{c}{v_0} = \frac{ch}{eV}. \quad (2.3)$$

При ускоряющем напряжении, большем некоторого определённого значения, зависящего только от материала анода, в рентгеновском спектре, кроме тормозного, появляется также характеристическое излучение.

То, что характеристический спектр состоит из отдельных линий, – следствие квантовой природы характеристического излучения: каждая линия рентгеновского спектра возникает в результате перехода атома из одного энергетического состояния в другое, и частота излучения определяется по правилу частот Бора:

$$h\nu = E_{n_1} - E_{n_2}. \quad (2.4)$$

Рентгеновское излучение характеризуется длинами волн $\lambda \sim (10^{-12} \div 10^{-9})$ м. Следовательно, разность энергий атома в начальном и конечном состоянии в процессе испускания характеристического излучения очень велика. Для атомов тяжёлых элементов она в $10^3 \div 10^5$ раз больше соответствующей разности в оптической области спектра. Объяснить этот факт можно, если предположить, что квантовые переходы, соответствующие испусканию рентгеновского излучения, совершаются *внутренними*, а не валентными электронами атома. В соответствии с этими представлениями механизм возникновения спектра характеристического рентгеновского излучения следующий.

Электрон, падающий на материал анода, может выбить электрон с одной из внутренних оболочек атома, в результате чего в ней образуется вакантное квантовое состояние. Электроны с более удалённых от ядра оболочек, обладающие более высокой энергией, могут перейти в освободившееся состояние. В результате этого перехода испускается квант излучения, соответствующий рентгеновской области.

Энергию электрона, расположенного в одной из внутренних оболочек атома, можно представить в виде

$$E_n = -\frac{Rhc}{n^2}(Z - a_n)^2, \quad (2.5)$$

где a_n – постоянная экранирования ($a_n \ll Z$).

Частота кванта, испущенного при переходе электрона из состояния, которое характеризуется главным квантовым числом n_1 , в освободившееся состояние на внутренней оболочке, которому соответствует главное квантовое число n_2 , определяется по правилу частот Бора:

$$\nu = \frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{h} = \frac{Rc}{n_1^2} (Z - a_1)^2 - \frac{Rc}{n_2^2} (Z - a_2)^2. \quad (2.6)$$

Так как внутренние оболочки атомов имеют аналогичное строение, то поправки a_n в формуле (2.6) для определённой оболочки ($1s$, $2s$, $2p$ и т. д.) у разных атомов должны быть близкими по величине. Действительно, постоянная экранирования a_n очень слабо зависит от порядкового номера элемента Z , но заметным образом – от квантовых чисел n и l ¹. Поэтому структура рентгеновских спектров всех тяжёлых атомов должна быть аналогична; при этом у более тяжёлых атомов спектр смещается в направлении больших частот.

Общий вид рентгеновского терма, как следует из (2.5), может быть представлен следующим образом:

$$T(n) = \frac{R(Z - a_n)^2}{n^2}. \quad (2.7)$$

В 1913 году экспериментально был открыт закон Мозли: корень квадратный из частоты спектральной линии характеристического излучения элемента линейно зависит от его порядкового номера:

$$\sqrt{\frac{\nu}{R}} = \frac{Z - a_n}{n}, \quad (2.8)$$

где R – постоянная Ридберга;

a_n – постоянная экранирования;

n – главное квантовое число.

Ясно, что зависимость (2.8) легко получить как приближённое следствие соотношения (2.6), подбирая в качестве значения постоянной a_n некоторое среднее из значений постоянных экранирования a_{n_1} и a_{n_2} .

¹ Для электронов K -слоя ($n = 1$) экранирующее действие остальных электронов наименьшее, и постоянная экранирования a_n невелика: от 1 до 3. Электроны L -слоя экранируются сильнее. Точные значения a_n могут быть определены только экспериментально.

Закон Мозли стал неопровергимым доказательством правильности размещения элементов в периодической системе элементов Д. И. Менделеева и важным средством для выяснения физического смысла величины Z . Кроме того, с применением этого закона были найдены правильные порядковые номера некоторых элементов. В частности, Мозли поменял местами никель и кобальт (до этого никель Ni имел меньший порядковый номер, чем кобальт Co), а также оставил место для элемента с порядковым номером $Z = 43$ (технеция), который ещё не был известен.

В зависимости от ряда факторов (в частности, от числа нуклонов в ядре атома, состояния внешних электронных оболочек и др.) положение спектральных линий рентгеновского спектра может несколько изменяться. Изучая эти смещения, можно производить детализацию сведений об атоме. Таким образом, закон Мозли составляет основу *рентгеновского спектрального анализа*.

Каждый рентгеновский терм соответствует состоянию атома, из которого удалён один из электронов. Поэтому при рассмотрении спектров рентгеновского излучения пользуются схемой уровней энергии для таких состояний атома, в которых с некоторого рассматриваемого одноэлектронного уровня удалён один электрон, а число электронов на всех остальных уровнях осталось неизменным. В результате удаления одного из электронов энергия атома возрастает на величину, равную энергии связи электрона, который был удалён из атома. Значение этой энергии тем больше, чем глубже на обычной диаграмме уровней лежит соответствующий одноэлектронный уровень. Поэтому схема рентгеновских уровней является *обращённой* по отношению к обычной схеме уровней атома (рисунок 2.3).

У полностью заполненной оболочки полные моменты $\vec{L}, \vec{S}, \vec{J}$ равны нулю. Если из этой оболочки удалён электрон, имеющий орбитальный, спиновый и полный моменты $\vec{l}_i, \vec{s}_i, \vec{j}_i$ соответственно, то оставшаяся конфигурация характеризуется орбитальным, спиновым и полным моментами, отличающимися только знаком от соответствующих моментов удалённого электрона. Поэтому состояния замкнутой оболочки, потерявшей один электрон, характеризуются теми же квантовыми числами L, S и J , что и состояния одного электрона. В частности, рентгеновские термы дублетные (рисунок 2.3).

Подобно тому, как это было сделано для оптических спектров, линии характеристического рентгеновского спектра можно объединить в серии. Если электрон выбит из K -оболочки ($n = 1$), то в рентгеновском спектре испускания наблюдается K -серия, при образовании вакансии в L -оболочке возникает L -серия и т. д.

Пользуясь схемой, изображенной на рисунке 2.3, проанализируем структуру рентгеновских спектров. Каждому электрону, находящемуся в K -оболочке, соответствуют квантовые числа $n = 1, l = 0, s = \frac{1}{2}, j = \frac{1}{2}$. При удалении одного электрона орбитальное, спиновое и внутреннее квантовые числа оболочки имеют значения: $L = 0, S = \frac{1}{2}, J = \frac{1}{2}$, то есть реализуется состояние атома $^2S_{1/2}$, и расщепления энергетического уровня не происходит.

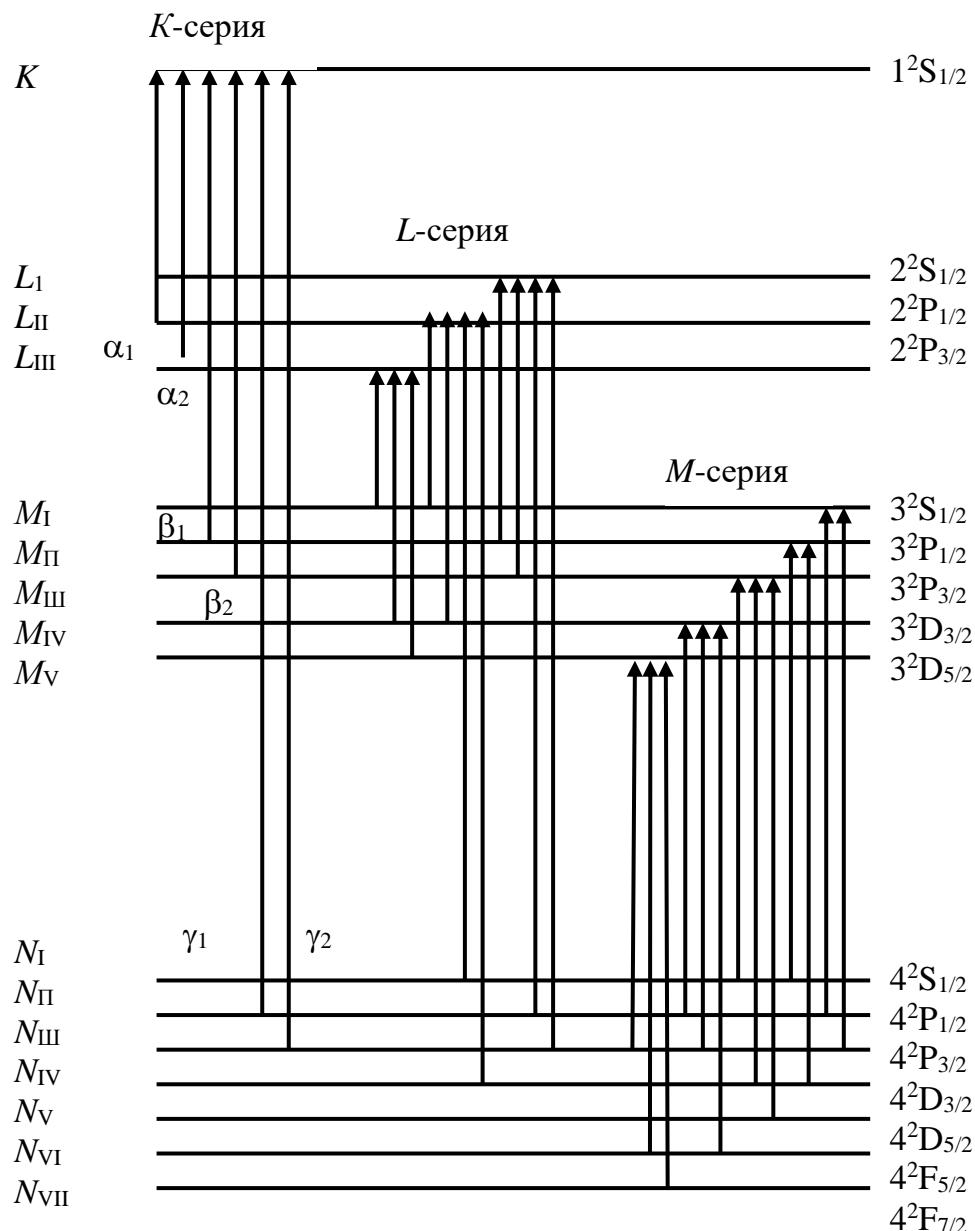


Рисунок 2.3 – Структура энергетических уровней рентгеновских термов с учетом мультиплетного расщепления (без соблюдения масштаба)

Заполненной L -оболочке соответствует электронная конфигурация $2s^2 2p^6$. Если электрон удалён из $2s$ -оболочки, то возникает состояние $^2S_{1/2}$; если же электрон удалён из $2p$ -оболочки, то реализуется состояние $^2P_{1/2}$ или состояние $^2P_{3/2}$. Таким образом, с L -оболочкой связаны три рентгеновских уровня: L_I , L_{II} , L_{III} . Аналогичным образом объясняется структура энергетических уровней, соответствующих последующим рентгеновским термам.

Линии испускания в рентгеновских спектрах возникают в результате переходов между рентгеновскими уровнями, для которых выполнены правила отбора:

$$\Delta L = \pm 1, \quad \Delta J = 0, \pm 1.$$

В соответствии с этими правилами, в K -серии возникают линии K_{α_1} и K_{α_2} (при переходах между L - и K -термами), линии K_{β_1} и K_{β_2} (при переходах между M - и K -термами) и т. д. (рисунок 2.3).

Из приведённого объяснения следует, что при возбуждении наиболее глубоко лежащего K -слоя возникает не только K -серия, но и весь характеристический рентгеновский спектр, а при возбуждении какой-либо серии или линии рентгеновского излучения появляются все линии рентгеновского излучения с большими длинами волн.

Практически сразу после открытия рентгеновского излучения были изучены закономерности его взаимодействия с веществом, и возник новый раздел медицины – рентгенология, в которой изучается применение рентгеновского излучения для исследования строения и функций органов и систем, для рентгенодиагностики и рентгенотерапии заболеваний. Однако рентгеновское излучение может оказать нежелательное влияние на клетки здоровых тканей. Поэтому при использовании рентгеновского излучения должны соблюдаться все необходимые меры предосторожности.

Вопросы для самоконтроля

1. Каков диапазон длин волн рентгеновского излучения?
2. Как устроена рентгеновская трубка?
3. В чём состоит принципиальное различие тормозного и характеристического рентгеновских спектров?
4. Каковы физические механизмы образования тормозного и характеристического рентгеновского излучения?

5. Какие факты указывают на то, что образование характеристического рентгеновского излучения обусловлено переходами во внутренних электронных слоях атома?

6. Поясните с использованием диаграммы уровней как соотносятся между собой рентгеновские и оптические уровни энергии.

7. В чём состоят и чем обусловлены отличия рентгеновских и оптических спектров атомов?

8. Какие физические взаимодействия в атоме учитываются при определении энергии рентгеновского подуровня?

9. Каково содержание закона Мозли?

10. При выполнении каких условий возможны излучательные переходы между рентгеновскими подуровнями?

11. Поясните сериальные закономерности, свойственные характеристическим рентгеновским спектрам.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 4. ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ В РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРАХ НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ

Цель работы: изучить механизм возникновения тормозного и характеристического рентгеновского излучения и сериальные закономерности в спектрах испускания; проверить выполнение закона Мозли и исследовать зависимость границы тормозного спектра от кинетической энергии электронов, бомбардирующих анод.

Методика работы с компьютерной программой

Для выполнения виртуальной лабораторной работы «Изучение закономерностей в рентгеновских спектрах на основе компьютерной модели» следует открыть файл Virtual Lab.2.0 из родительского каталога. Данный программный продукт предназначен для виртуальных экспериментов по темам «Дифракция электронов на кристалле» и «Изучение рентгеновских спектров атома». После запуска программы на экране монитора появляется главное меню (рисунок 2.4).

Для начала работы необходимо выбрать один из пунктов меню блока управления 1:

- **Теория** 2 (методические рекомендации);
- **Допуск** 3 (тест по теме лабораторной работы);

- **Эксперимент 4** (реализация виртуального эксперимента);
- **Справка 5** (основная информация о программном продукте).

Чтобы программа не препятствовала работе с другими приложениями, её можно свернуть, нажимая кнопку 6. Для выхода из программы следует нажать кнопку 7 «**Закрыть**».

Чтобы перейти к опыту по изучению закономерностей в рентгеновских спектрах, необходимо нажать кнопку 3 и пройти тестирование; после получения допуска следует нажать кнопку 4 «**Эксперимент**».

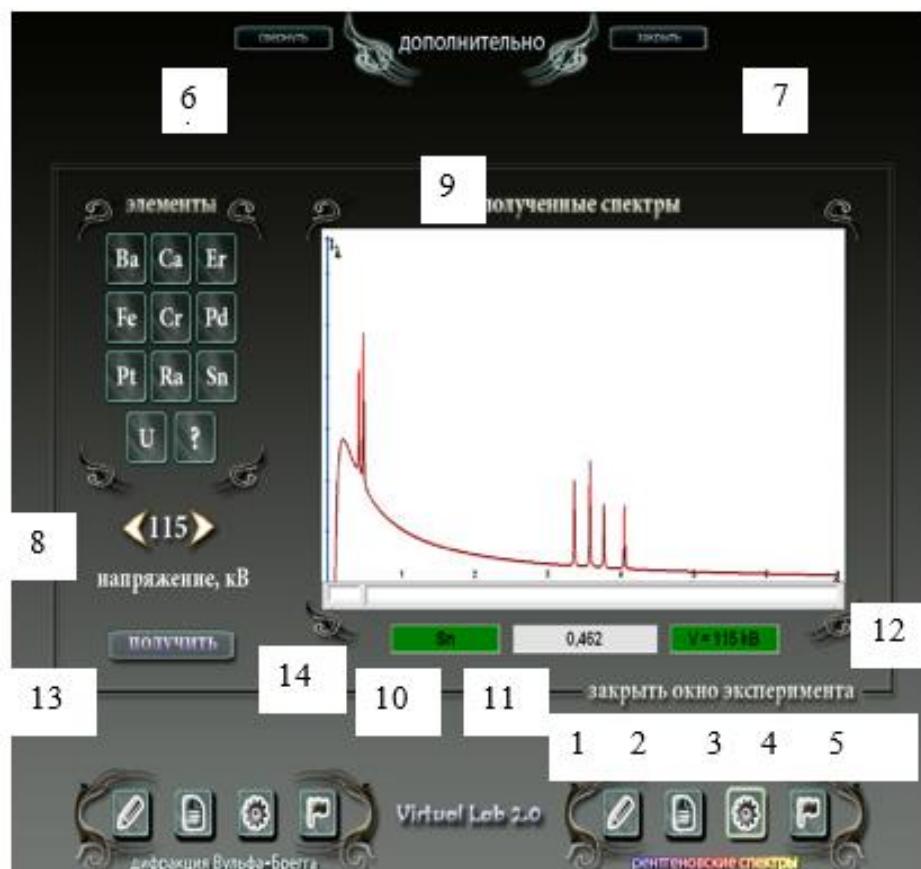


Рисунок 2.4 – Главное меню программы

Область управления работой программы содержит:

- панель выбора элементов и регуляции напряжения 8;
- окно отображения рентгеновского спектра 9;
- окно отображения символа выбранного элемента 10;
- окно отображения длины волны (в нанометрах) 11;
- окно отображения значения выбранного напряжения 12;
- кнопку «Получить» 13, предназначенную для запуска программы.

По завершении выполнения исследований следует нажать кнопку «**Закрыть окно эксперимента**» и выйти из программы.

Посредством регуляторов 8:

– устанавливается напряжение на аноде рентгеновской трубы (11, 42, 84 или 115 кВ);

– выбирается химический элемент для виртуального эксперимента.

Для проведения виртуального эксперимента необходимо:

1) задать посредством регуляторов 8 необходимые значения параметров эксперимента;

2) нажать кнопку 13 (рисунок 2.4) и убедиться, что в окне 10 появилось изображение символического обозначения выбранного элемента, а в окне 12 – значение выбранного напряжения;

3) в окне отображения рентгеновского спектра 9 наблюдать его графическое отображение;

4) установить курсор на ползунок 14, нажать левую кнопку компьютерной «мыши» и перемещать ползунок вдоль шкалы длин волн, последовательно устанавливая его в положение, при котором визирная линия совпадает с каждым наблюдаемым в рентгеновском спектре максимумом интенсивности, записать соответствующие им длины волн;

5) по окончании эксперимента выйти из программы, нажимая кнопку «Закрыть окно эксперимента».

Задание 1. Исследование зависимости границы спектра тормозного излучения от напряжения на рентгеновской трубке

При моделировании спектра испускания учитывается, что спектр состоит из двух составляющих – соответствующих тормозному и характеристическому излучению. Спектр испускания изображается на экране в виде графика зависимости спектральной плотности I_{λ} излучения рентгеновской трубы (или газовой струи, бомбардируемой электронами – для криптона и ртути) от длины волны: $I_{\lambda}(\lambda)$. Моделируется (при разных ускоряющих напряжениях) только фрагмент характеристической составляющей спектра, содержащий наиболее интенсивные линии: две линии из K-серии и четыре – из L-серии.

Порядок выполнения работы

1. Пройдите входное тестирование.

2. Выберите на панели управления программой атом бария (Ba), установите напряжение 11 кВ и нажмите кнопку 13.

3. Определите длину волны, соответствующую границе тормозного спектра, и запишите её значение в таблицу 2.1.

4. Определите положение границы тормозного спектра бария, последовательно устанавливая на панели 8 другие значения напряжения: 42, 84, 115 кВ. Запишите в таблицу 2.1 полученные при этом значения длины волн.

5. Постройте график зависимости $\frac{1}{\lambda_0} = f(U)$. Сформулируйте вывод о характере этой зависимости.

Таблица 2.1 – Зависимость положения границы тормозного спектра от напряжения на аноде рентгеновской трубы

Химический элемент	Напряжение на аноде, кВ			
	11	42	84	115
	Длина волны λ_0 , нм			
Барий, Ba				
Эрбий, Er				
Палладий, Pd				

6. Используя график зависимости $\frac{1}{\lambda_0} = f(U)$ и формулу связи

между частотой и длиной волны излучения, определите значение постоянной Планка.

7. Повторите действия, описанные в пп. 3–6, выбирая на панели 8 другие химические элементы, указанные в таблице 2.1.

8. Найдите среднее значение постоянной Планка, используя результаты, полученные на основе рентгеновских спектров разных атомов.

9. Сравните рентгеновские спектры каждого элемента, полученные при разных напряжениях, объясните причины наблюдаемых изменений.

10. Сформулируйте вывод о тенденции в изменении положения границы тормозного спектра:

- а) при увеличении напряжения на рентгеновской трубке;
- б) при увеличении порядкового номера элемента (при $U = \text{const}$).

Задание 2. Построение диаграмм Мозли

Порядок выполнения работы

1. Активируйте изображение *спектра испускания* атома кальция Ca при максимальном напряжении 115 кВ.

2. Измерьте и запишите в таблицу 2.2 длину волны λ_1 самой коротковолновой характеристической линии в K-серии атома кальция Ca.

3. Последовательно получите изображения спектров испускания других девяти атомов, перечисленных в форме таблицы 2.2, и определите для них длины волн λ_1 и λ_2 самых коротковолновых линий в K -серии и L -серии соответственно. Результаты измерений внесите в таблицу 2.2.

4. По данным таблицы 2.2 постройте диаграммы Мозли – графики зависимости $\sqrt{\frac{1}{\lambda_1}} = f(Z)$ и $\sqrt{\frac{1}{\lambda_2}} = f(Z)$. Сделайте вывод о том, выполняется ли закон Мозли в выполненнном модельном эксперименте. Объясните различия в результатах наблюдений и графических зависимостях.

Таблица 2.2 – Результаты определения коротковолновой границы K - и L -серии характеристических рентгеновских спектров

Элемент	Ca	Cr	Fe	Sn	Ba	Pd	Pt	Er	Ra	U	
Z											
λ_1											
$\sqrt{\frac{1}{\lambda_1}}$											
λ_2											
$\sqrt{\frac{1}{\lambda_2}}$											

5. Выполните измерения, указанные в п. 2, после активации спектра испускания неизвестного элемента, идентифицируйте его, пользуясь построенными вами диаграммами Мозли, и внесите соответствующую ему информацию в последнюю графу таблицы 2.2.

Задание 3. Определение постоянных экранирования для L - и M -слоя

Порядок выполнения работы

1. Активируйте изображение *спектра испускания* атома платины (Pt) при максимальном напряжении 115 кВ.

2. Измерьте длины волн всех шести моделируемых характеристических линий: двух в K -серии и четырёх – в L -серии. Результаты занесите в таблицу 2.3, сопоставляя длину волны квантовому переходу.

3. Вычислите энергию квантов E_k , соответствующих измеренным длинам волн, и запишите её значения в таблицу 2.3.

Таблица 2.3 – Результаты изучения квантовой структуры рентгеновских уровней и характеристического спектра

Элемент	Определяемые величины	Спектральная серия					
		<i>K</i> -серия		<i>L</i> -серия			
		Квантовый переход					
		<i>K</i> – <i>M</i>	<i>K</i> – <i>L</i>	<i>L</i> _{II} – <i>M</i> _I	<i>L</i> _{III} – <i>M</i> _I	<i>L</i> _{II} – <i>M</i> _{IV}	<i>L</i> _{III} – <i>M</i> _{IV}
Pt	λ_k						
	Энергия кванта ε_k						
U	λ_k						
	Энергия кванта, ε_k						

4. Используя длину волны линии K_a , соответствующую переходу K – L , формулу (2.6), принимая в ней значение постоянной экранирования в состоянии с $n_1 = 1$ (для K -слоя) равным $a_1 = 1$, вычислите постоянную экранирования a_2 (для L -слоя) для электрона в атоме платины.

Запишите вычисленное значение постоянной a_2 в таблицу 2.4.

Таблица 2.4 – Постоянные экранирования и уровни энергии

Электронный слой	<i>K</i>	<i>L</i>	<i>M</i>
Атом платины			
Постоянная экранирования			
Оценочное значение энергии уровней			
Атом урана			
Постоянная экранирования			
Оценочное значение энергии уровней			

5. Используя значение указанной преподавателем длины волны одной из линий, относящихся к L -серии, и формулу

$$v = \frac{E_{n_3} - E_{n_2}}{h} = \frac{Rc}{n_2^2} (Z - a_2)^2 - \frac{Rc}{n_3^2} (Z - a_3)^2,$$

в которой a_2 – значение постоянной экранирования, найденное при выполнении п. 4, определите значение постоянной экранирования a_3 и запишите его в таблицу 2.4.

6. Применяя формулу (2.5) и учитывая значения постоянных a_1 , a_2 и a_3 оцените последовательно значения энергии электрона в K -слое, в L -слое, в M -слое и запишите их в таблицу 2.4.

7. Активируйте изображение *спектра испускания* атома урана U при максимальном напряжении 115 кВ.

8. Выполните действия, описанные в пп. 2–6, применительно к атому урана.

9. Оформите отчёт о работе, завершая его выводами, формулируемыми в соответствии с целями работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ахиезер, А. И. Атомная физика : справочное пособие / А. И. Ахиезер. – Киев : Наукова думка, 1988. – 268 с.
2. Богацкая, А. В. Атомная физика : учебное пособие / А. В. Богацкая, А. М. Попов. – Москва : Ай Пи Ар Медиа, 2023. – 687 с.
3. Годлевская, А. Н. Физика атома и атомных явлений : учебное пособие / А. Н. Годлевская, В. Г. Шолох; под ред. А. А. Сокольского. – Гомель : ГГУ им. Ф. Скорины, 2017. – 307 с.
4. Горлач, В. В. Физика : квантовая физика. Лабораторный практикум : учебное пособие для вузов / В. В. Горлач. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Изд-во Юрайт, 2025. – 114 с.
5. Граков, В. Е. Атомная физика : лабораторный практикум для студентов физического факультета / В. Е. Граков, А. А. Сокольский, Г. Ф. Стельмах. – 2-е изд., перераб. и доп. – Минск : БГУ, 2012. – 231 с.
6. Иванов, В. К. Физика. Введение в квантовую физику : учебное пособие для вузов / В. К. Иванов. – Санкт-Петербург : Лань, 2025. – 256 с.
7. Матвеев, А. Н. Атомная физика : учебное пособие для студентов вузов / А. Н. Матвеев. – 2-е изд. – М. : ОНИКС, Мир и Образование, 2007. – 430 с.
8. Милантьев, В. П. Атомная физика : учебник и практикум для вузов / В. П. Милантьев. – 2-е изд., испр. и доп. – М. : Юрайт, 2025. – 415 с.
9. Попов, А. М. Атомная физика : учебное пособие / А. М. Попов, О. В. Тихонова. — М. : МГУ, 2019. – 364 с.
10. Практикум по атомной физике / под ред. Л. И. Киселевского. – Минск : Университетское, 1989. – 176 с.
11. Сивухин, Д. В. Общий курс физики : в 5 т. Т. 5. Атомная и ядерная физика / Д. В. Сивухин; под ред. Д. А. Миртовой. – М. : Физматлит, 2024. – 784 с.
12. Шпольский, Э. В. Атомная физика. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома / Э. В. Шпольский. – 6-е изд., стер. – Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2010. – 441 с.
13. Яворский, Б. М. Справочник по физике для инженеров и студентов вузов / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф, А. К. Лебедев. – 8-е изд. – М. : Оникс, Мир и образование, 2006. – 1056 с.

Производственно-практическое издание

**Годлевская Анна Николаевна,
Шолох Валентина Григорьевна,
Шамына Антон Александрович**

**ФИЗИКА АТОМА И ВВЕДЕНИЕ
В КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ:
СОСТОЯНИЯ И СПЕКТРЫ
МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ**

Практическое пособие

Редактор Е. С. Балашова
Корректор В. В. Калугина

Подписано в печать 10.12.2025. Формат 60x84 1/16.

Бумага офсетная. Ризография.

Усл. печ. л. 2,79. Уч.-изд. л. 3.05.

Тираж 25 экз. Заказ 697.

Издатель и полиграфическое исполнение:
учреждение образования

«Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины».

Специальное разрешение (лицензия) № 02330 / 450 от 18.12.2013 г.

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,

распространителя печатных изданий в качестве:

издателя печатных изданий № 1/87 от 18.11.2013 г.;

распространителя печатных изданий № 3/1452 от 17.04.2017 г.

Ул. Советская, 104, 246028, Гомель.